ML 05: BACK PROPAGATION

지난시간엔 왜 *neural network* 를 사용하는지 알아보았다. 데이터의 차수가 매우 클 때 *logistic regression* 으로는 성능이 떨어지거나 *overfitting* 의 문제가 발생할 수 있다는 사실을 알게 되었고, 마지막엔 *multi class* 문제를 어떻게 해결할지도 잠깐 논의 해봤다.

이번에는 *back propagation*, *gradient checking* 에 대해서 배워보자.

Cost Function

시작하기 전에 몇 가지 표기법을 정의하자.

`L` 을 레이어의 수, `s_1` 을 해당 레이어의 유닛 수라 하자. 그러면 *bianry classification* 에서 `S_L = 1` 이다. 아웃풋 레이어의 유닛 수를 더 간단히 `K` 라 하자.

이제 *neural network* 에 대한 *cost function* 을 볼건데 먼저 *binary classification* 의 *regularized cost function* 식을 다시 보자.

$$J(\theta) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\left[-y^{(i)}\log(h_\theta(x^{(i)})) - (1-y^{(i)})\log(1-h_\theta(x^{(i)}))\right] + \frac{\lambda}{2m}\sum_{j=1}^{n}\theta_j^2.$$

지난 시간에 언급했듯이 신경망에서 각 단계는 *logistic regression* 과 같이 때문에 `L` 의 신경망은 `L-1` 의 *logistic regression* 의 식으로 변환할 수 있다.

$$h_\Theta(x) \in \mathbb{R}^K \quad (h_\Theta(x))_i = i^{th} \text{ output}$$

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m}\left[\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{K} y_k^{(i)}\log(h_\Theta(x^{(i)}))_k + (1-y_k^{(i)})\log(1-(h_\Theta(x^{(i)}))_k)\right] + \frac{\lambda}{2m}\sum_{l=1}^{L-1}\sum_{i=1}^{s_l}\sum_{j=1}^{s_{l+1}}(\Theta_{ji}^{(l)})^2$$

~~이 식의 가장 큰 문제점은 이 식을 보면 당황스럽다는 것이다.~~

뒷 부분 *regularization term* 은 이해하기 어렵지 않다. 신경망에선 `weight` (*theta*) 의 행렬이 이전 레이어와 다음 레이어의 유닛 수로 구성되므로 `(theta_ji^l)^2` 으로 모든 `theta^2` 를 구할 수 있다.

여기서 `i = 1` 부터 시작하는 이유는 *logistic regression* 의 *regularization term* 에서 `theta_0` 을 포함하지 않는것과 같다.

문제는 시그마 `K` 부분인데, `K` 가 이 신경망에서 클래스의 개수 라는 점을 고려하면 `y_k` 는 `[0; 0; 1; 0; ...]` 에서 `k` 번째 값, `(h0)_k` 또한 `k` 번째 *output unit* 의 값 이라 보면 된다.

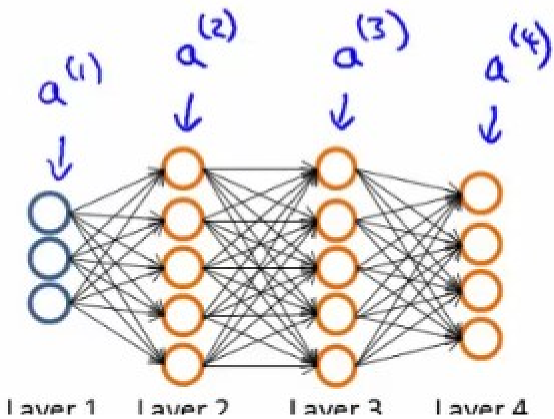
원래 *cost function* 정의 자체가 우리가 가진 *hypothesis* 로 구한 값과 본래의 값 `y` 와의 차이를 알려주는 것이므로 `K` 개의 클래스가 있을때는 각 클래스 위치의 값과 본래의 *k-dimensional vector* `y` 값의 해당 포지션의 차이를 모두 합한 값을 구하는 것이라 *neural network* 의 *cost function* 정의할 수 있다.

Backpropagation: Algorithm

gradient computation 을 위해서는 *cost function* 과 각 `l` 의 `i`, `j` 위치의 `theta` 에 대해서 *cost function* 의 *partial derivative* 를 구해야 한다. ~~네?~~

$$\frac{\partial}{\partial \Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta)$$

(http://www.holehouse.org/)



다음과 같은 신경망이 있다고 하자, 그리고 *training set* 이 `(x, y)` 만 있다고 한다면 *cost function* 을 얻기 위해 다음의 *forward propagation* 을 진행하면 된다.

$$
\begin{aligned}
a^{(1)} &= x \\
z^{(2)} &= \Theta^{(1)} a^{(1)} \\
a^{(2)} &= g(z^{(2)}) \quad (\text{add } a_0^{(2)}) \\
z^{(3)} &= \Theta^{(2)} a^{(2)} \\
a^{(3)} &= g(z^{(3)}) \quad (\text{add } a_0^{(3)}) \\
z^{(4)} &= \Theta^{(3)} a^{(3)} \\
a^{(4)} &= h_\Theta(x) = g(z^{(4)})
\end{aligned}
$$

(http://www.holehouse.org/)

그럼 `i, j, l` 에 대한 *cost function* 의 *partial derivative* 는 어떻게 구할까?

back propagation 을 이용하면 된다. 개요는 이렇다. 마지막 단계에서 신경망을 이용해 얻은 값 `a4` 와 실제 값인 `y` 의 차이를 `d4` (*delta*) 라 하자. 보면 알겠지만 이건 *error* 다. 이 에러값을 이용해 `d3` 즉 레이어 3 에서의 에러값을 구하고, 반복하면서 `d2` 까지 구한다. (`d1` 은 없다. `a1` 이 *input* 이기때문)

forward propagation 과 다르게 뒤에서 앞쪽으로 *error* 가 전파되기 때문에 *back propagation, BP* 라 부른다. BP 로 찾은 `d` 값을 이용하면 *partial derivative* 를 쉽게 구할 수 있다. `d3, d2` 를 구하는 방법은 아래와 같다.

$$
\begin{aligned}
\delta^{(3)} &= (\Theta^{(3)})^T \delta^{(4)} .* g'(z^{(3)}) \\
\delta^{(2)} &= (\Theta^{(2)})^T \delta^{(3)} .* g'(z^{(2)})
\end{aligned}
$$

(http://www.holehouse.org/)

식에 대한 *intuition* 은 이전 레이어의 유닛의 `d` 를 얻기 위해서 다음 레이어의 모든 `d` 와 `theta` 의 곱을 이용한다는 사실이다. 이건 *FP* 에서 다음 단계의 유닛 `a` 를 얻기 위해 이전 단계의 모든 유닛과 `theta` 를 이용한다는 사실을 거꾸로 생각해보면 이해할 수 있다.

이때 *sigmoid function* `g` 의 미분은 `g' = g(1-g)` 이고, `g'(z3)` 는 `a3 * (1 - a3)` 으로 고쳐쓸 수 있다.

만약에 *regularization term* 을 무시한다면 다시 말해 `lambda = 0` 이면, *partial derivative* 는 `d` 를 이용해 쉽게 작성할 수 있다.

알고리즘을 좀 자세히 살펴보면

Backpropagation algorithm

Training set $\{(x^{(1)}, y^{(1)}), \ldots, (x^{(m)}, y^{(m)})\}$

Set $\triangle_{ij}^{(l)} = 0$ (for all l, i, j).

For $i = 1$ to m

Set $a^{(1)} = x^{(i)}$

Perform forward propagation to compute $a^{(l)}$ for $l = 2, 3, \ldots, L$

Using $y^{(i)}$, compute $\delta^{(L)} = a^{(L)} - y^{(i)}$

Compute $\delta^{(L-1)}, \delta^{(L-2)}, \ldots, \delta^{(2)}$

$\triangle_{ij}^{(l)} := \triangle_{ij}^{(l)} + a_j^{(l)} \delta_i^{(l+1)}$

(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

지금까지의 설명과 같이 먼저 *FP* 를 진행해서 각 레이어의 유닛 `a` 을 구하고, *BP* 를 진행한다.

이 때 마지막 단계에서 삼각형(*large delta*, `Delta`) 에 이전 단계의 `DELTA` 와 `aj^(l)di(l+1)` 를 더하는데, 사실 `aj^(l)di(l+1)` 가 바로 *reulgarization term* 을 무시했을 때의 *partial derivative* 다.

이렇게 모든 `DELTA` 를 구하고 나서 이제 `D` 에 *regulization term* 을 추가한다.

$$D_{ij}^{(l)} := \frac{1}{m}\Delta_{ij}^{(l)} + \lambda\Theta_{ij}^{(l)} \text{ if } j \neq 0$$
$$D_{ij}^{(l)} := \frac{1}{m}\Delta_{ij}^{(l)} \qquad \text{ if } j = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial\Theta_{ij}^{(l)}} J(\Theta) = D_{ij}^{(l)}$$

(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

이제 *regularization term* 까지 더한 `D` 가 바로 *partial derivative* 다. ~~너무 난해하다~~

Back propagation: Intuition

조금 더 *Back propagation, BP* 를 살펴보자. `dj^(l-1)` 를 얻기 위해 `d^(l)` 과 `theta` 를 이용한다는 사실은 알겠다. 근데 `g'` 이라던지 이런건 도대체 어디서 나온걸까?

처음으로 다시 돌아가면 *cost function* 에서 *training set* 이 1개라면 다시 말해 `m=1` 이고, `lambda=0` 이라면 *cost function* 은 `h(x), y` 에 의해 좌우된다. 결국 *squared error* 와 다를바 없다는 소리다.

What is backpropagation doing?

$$J(\Theta) = -\frac{1}{m}\left[\sum_{i=1}^{m} y^{(i)}\log(h_\Theta(x^{(i)})) + (1-y^{(i)})\log(1-(h_\Theta(x^{(i)})))\right]$$
$$\cancel{+\frac{\lambda}{2m}\sum_{l=1}^{L-1}\sum_{i=1}^{s_l}\sum_{j=1}^{s_{l+1}}(\Theta_{ji}^{(l)})^2}$$

$(x^{(i)}, y^{(i)})$

Focusing on a single example $x^{(i)}$, $y^{(i)}$, the case of 1 output unit, and ignoring regularization ($\lambda = 0$),

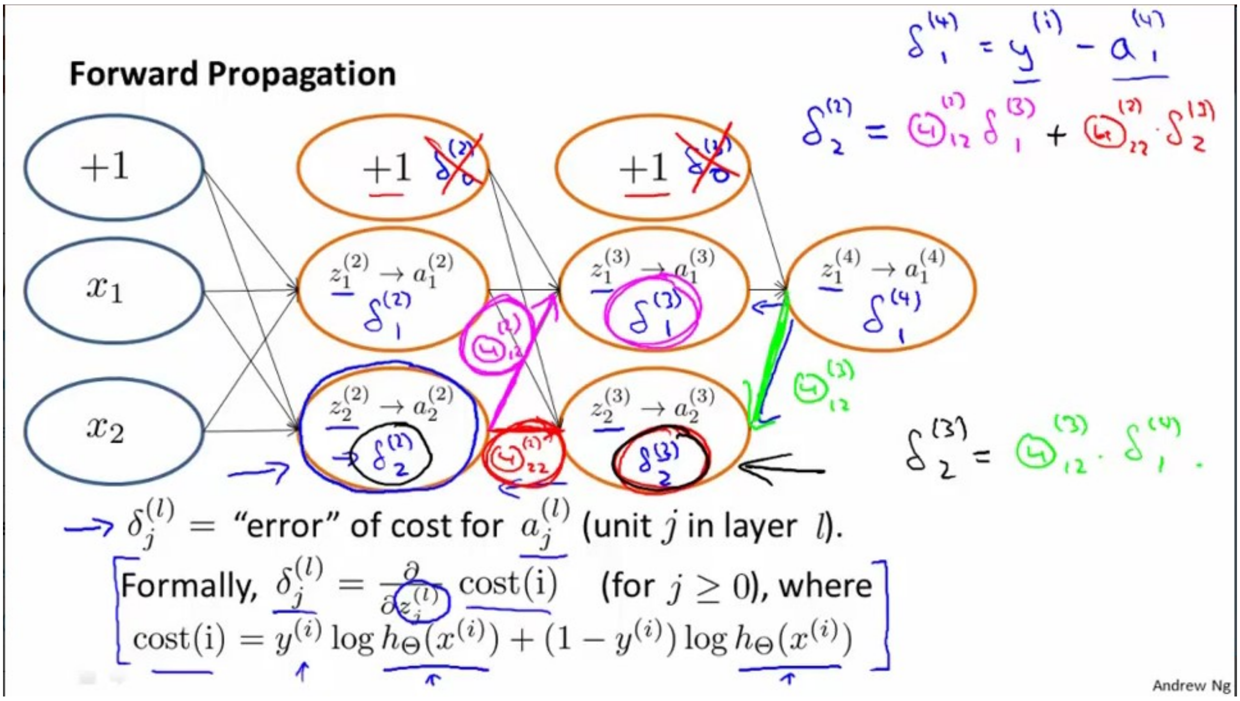
$$\boxed{\text{cost}(i) = y^{(i)}\log h_\Theta(x^{(i)}) + (1-y^{(i)})\log h_\Theta(x^{(i)})}$$

(Think of $\text{cost}(i) \approx (h_\Theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$)

I.e. how well is the network doing on example i?

(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

결국 `dj^(l)` 은 `aj^(l)` 의 *error of cost* 다. 더 엄밀히 수학적으로 말하자면 `dj^(l)` 은 `cost(i)` 에 대한 `zj^(l)` 의 *partial derivative* 다. `zj^(l)` 이 변할때 `i` 에 대한 *cost* 가 얼마나 변하는지가 바로 `d` 란 이야기다.



(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

`d` 에 대한 더 엄밀한 수학적 증명은

$$deltakm_k = fracpartial J(Theta) partial z_k = fracpartial J(Theta) partial a_k fracpartial a_k partial z_k = Theta_k delta_{k+1} cdot g'(z_k)\ Delta w_{ij} = Delta w_{ij} + fracpartial J(Theta) partial w_{ij} = Delta w_{ij} + a_j^l cdot delta_k^(l+1)\ fracpartial J(Theta) partial w_{ij} = fracpartial J(Theta) partial z_k cdot fracpartial z_k partial w_{ij}$$

(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

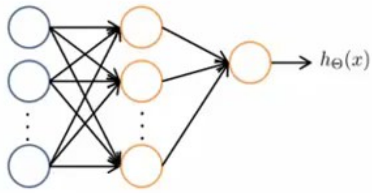
Unrolling Parameters

octave 에서 `reshape` 함수를 이용해서 벡터를 매트릭스로 변환하는 방법을 알려준다.

Example

Example

$s_1 = 10, s_2 = 10, s_3 = 1$



$\boxed{\Theta^{(1)} \in \mathbb{R}^{10\times 11}}, \Theta^{(2)} \in \mathbb{R}^{10\times 11}, \Theta^{(3)} \in \mathbb{R}^{1\times 11}$

$D^{(1)} \in \mathbb{R}^{10\times 11}, D^{(2)} \in \mathbb{R}^{10\times 11}, D^{(3)} \in \mathbb{R}^{1\times 11}$

$\Theta^{(1)}$ $\Theta^{(2)}$ $\Theta^{(3)}$

```
thetaVec = [ Theta1(:); Theta2(:); Theta3(:)];
DVec = [D1(:); D2(:); D3(:)];

Theta1 = reshape(thetaVec(1:110),10,11);
Theta2 = reshape(thetaVec(111:220),10,11);
Theta3 = reshape(thetaVec(221:231),1,11);
```

Learning Algorithm

- Have initial parameters $\Theta^{(1)}, \Theta^{(2)}, \Theta^{(3)}$.
- Unroll to get `initialTheta` to pass to
- `fminunc(@costFunction, initialTheta, options)`

```
function [jval, gradientVec] = costFunction(thetaVec)
```

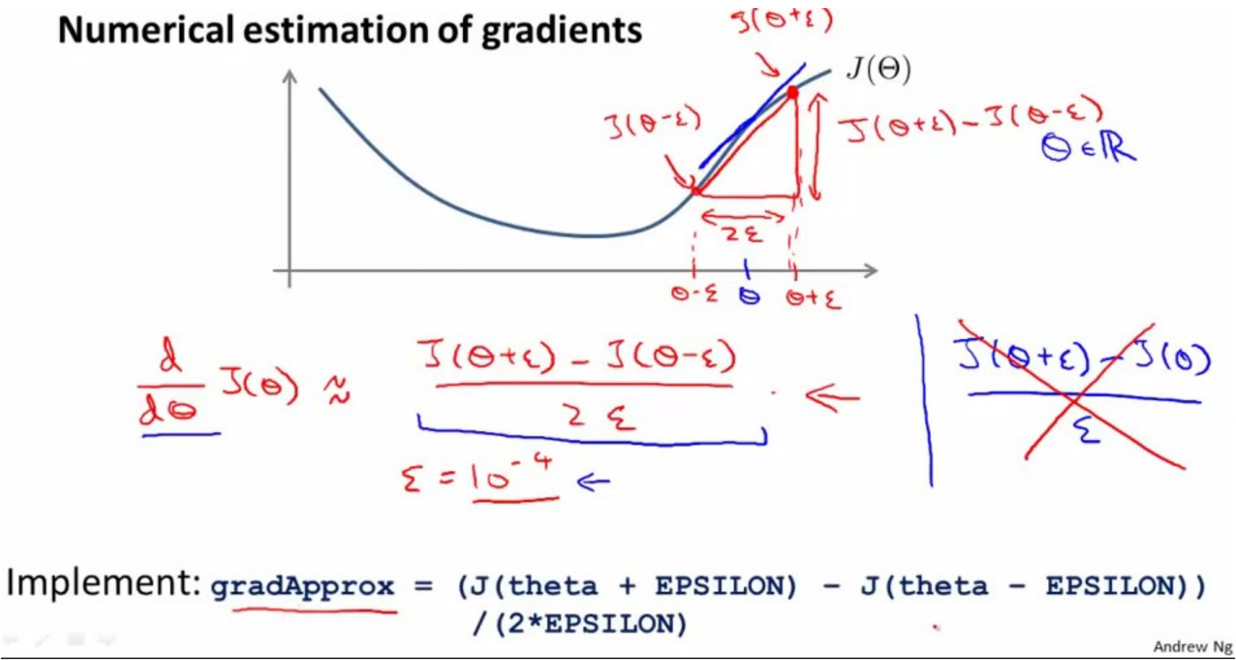
- From `thetaVec`, get $\Theta^{(1)}, \Theta^{(2)}, \Theta^{(3)}$. reshape
- Use forward prop/back prop to compute $D^{(1)}, D^{(2)}, D^{(3)}$ and $J(\Theta)$.
  Unroll $D^{(1)}, D^{(2)}, D^{(3)}$ to get `gradientVec`.

(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

Gradient Checking

BP 를 이용해서 *neural network* 의 *cost function* 을 위한 *partial derivative* 를 구하는 방법을 배웠는데, 안타깝게도 이게 쉽게 구현할 수 있는것이 아니라서 버그가 생길 수 있다.

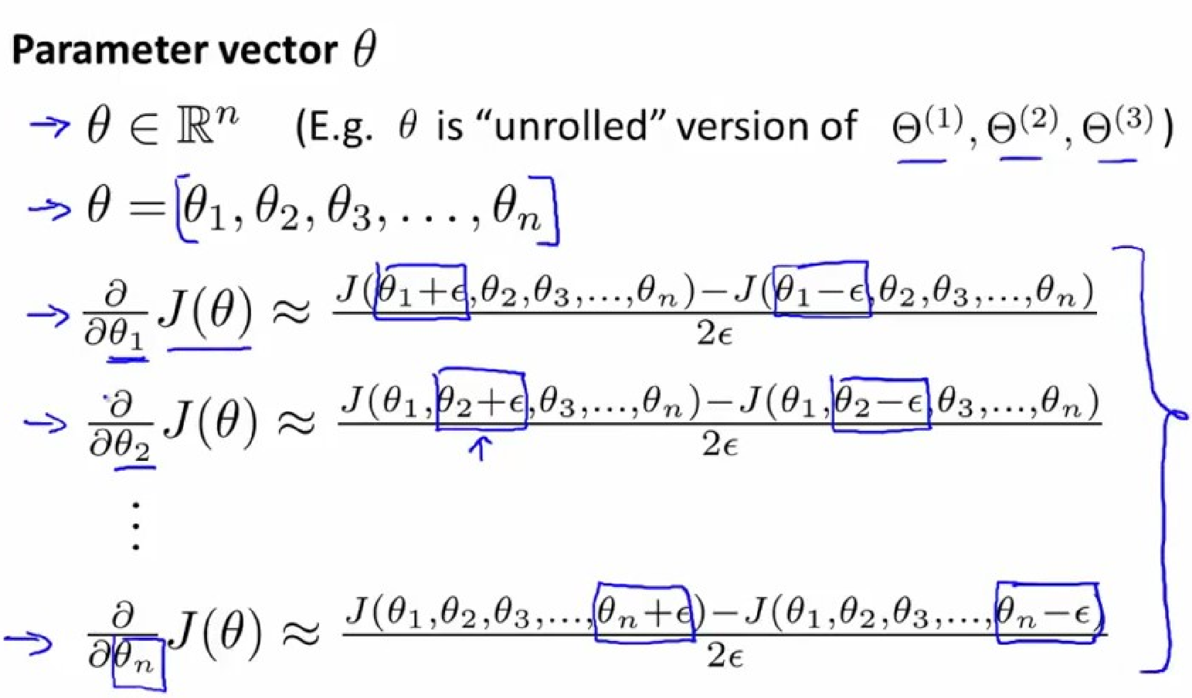
gradient checking 이란 방법을 이용하면 *FP, BP* 의 구현이 완벽함을 보일 수 있다. 배워보자.

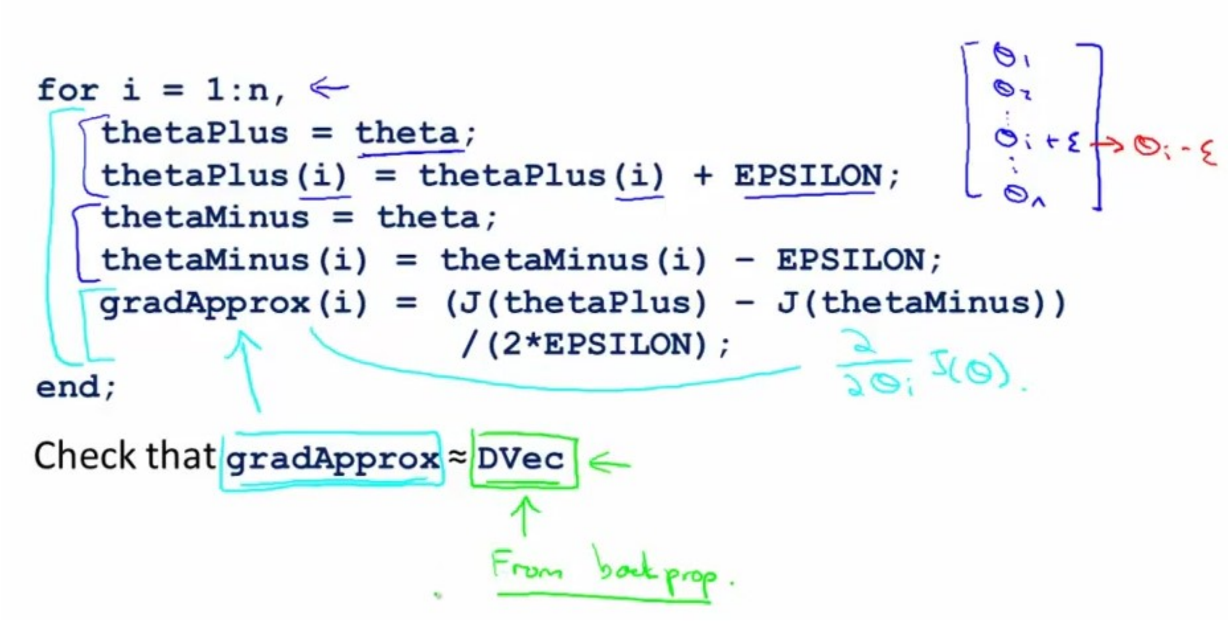


(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

말 그대로 기울기에 대한 근사치를 구해서 비교하여 검증하는 방법이다. `e`(엡실론) 이 매우 작다 하고, `θ-e` 와 `θ+e` 두 점 사이의 기울기를 구해 *gradient* 와 근사한 값을 구한다.

우리는 `θ` 가 하나가가 아니기 때문에, 각각의 `θ`(`theta`) 에 대해 모두 *gradient* 의 근사치를 구해야 한다.

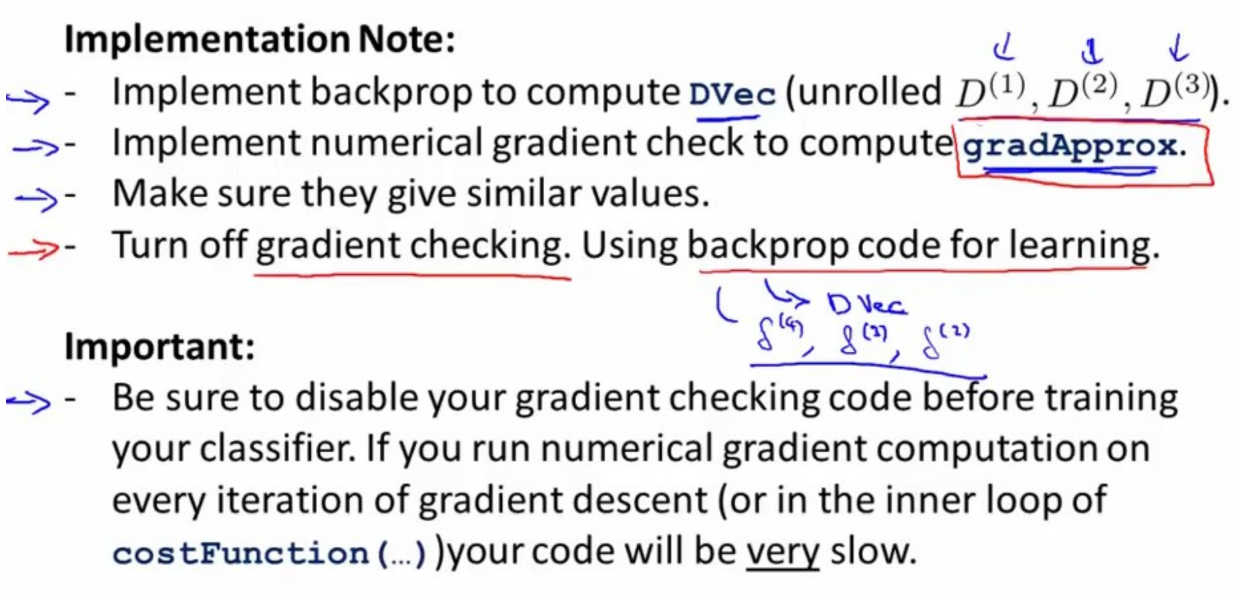




(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

마지막에서 *gradient checking* 을 이용해 구한 `gradApprox` 와 실제 *BP 를 이용해 구한 *graident* 인 `Dvec` 과 비슷한지 검사한다.

그러나, 한가지 알아야할 사실이 있다. *gradient checking* 은 굉장히 비싸기 때문에 `Dvec` 과 비슷한 값을 구했는지 검사한 후에는 *gradient checking* 를 꺼야한다.

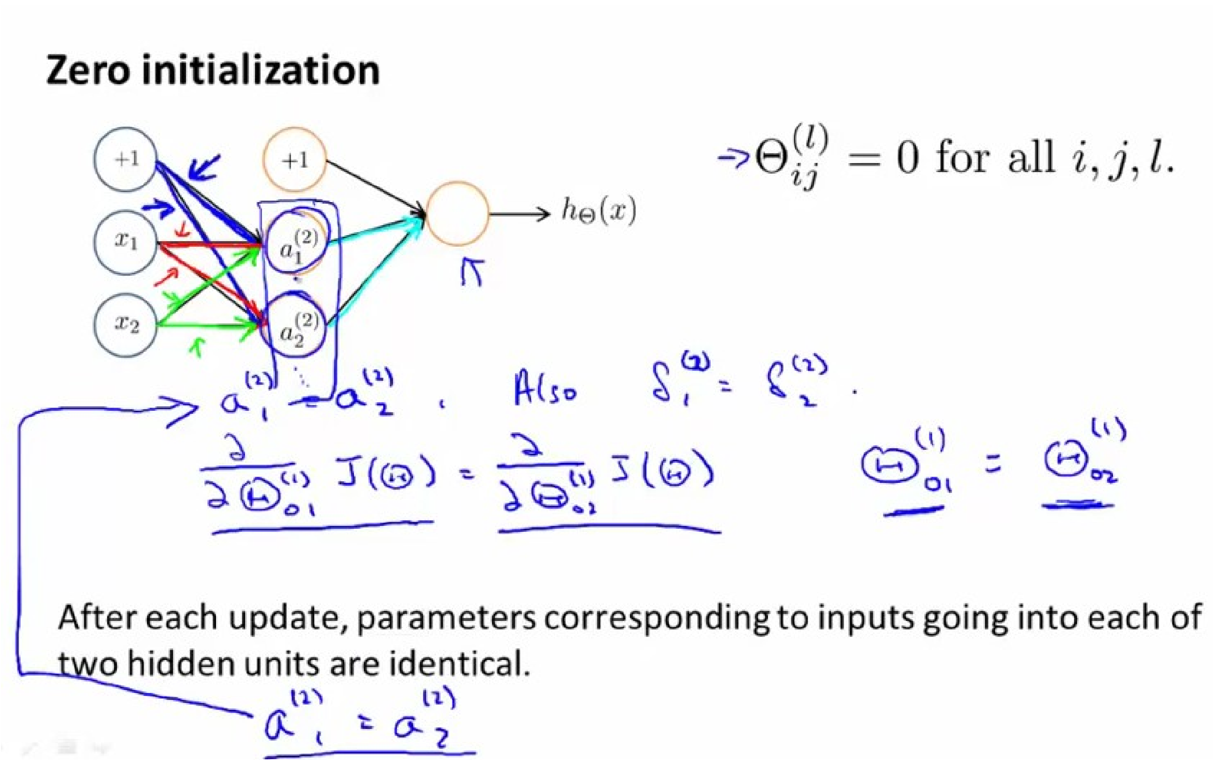


(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

Random Initialization

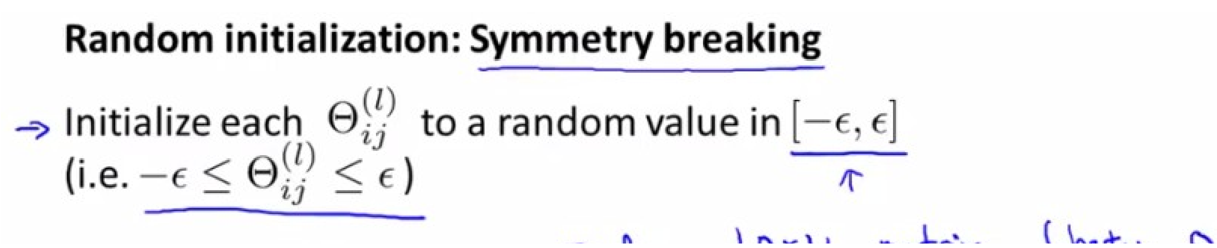
gradient desecnt 를 위한 함수를 사용할때 `initialTheta` 를 줘야한다. 그냥 `zeros` 로 만들까? *neural network* 에서 모든 `theta` 가 `0` 으로 시작하면 모든 유닛의 값이 같아진다. 오류(`d`) 도 같고, *partial derivative* 의 값도 같으므로 다음 이터레이션에서도 같은 유닛은 같은 값을 가지고 이게 반복된다.

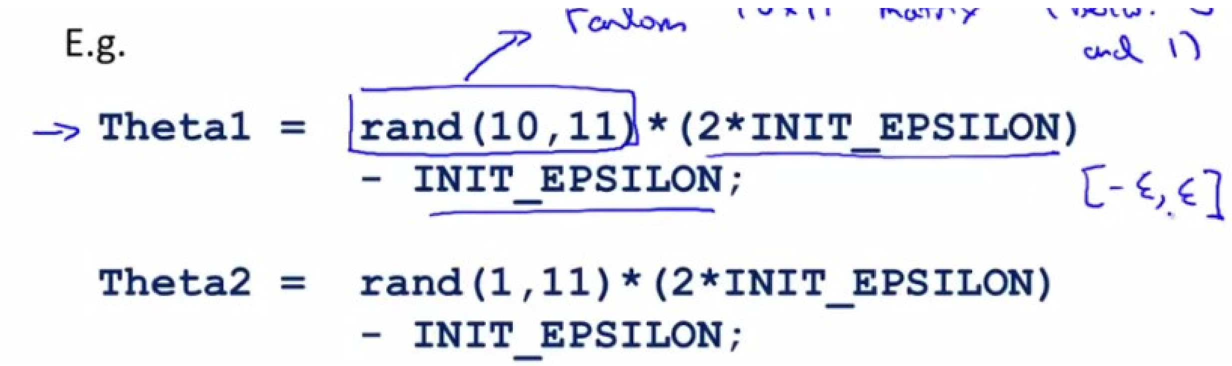
결국 내가 가진 모든 히든 유닛이 같은 계산을 해 내고 있으므로, 하나의 *feature* 에 대한 극도로 중복된 연산을 볼 수 있다.



(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

`theta` 가 대칭이기 때문에 발생하는 문제인데 *symmetry breaking* 을 위해 `[-e, e]` 사이의 `theta` 를 랜덤으로 골라보자. 물론 이 `e` 는 *gradient checking* 에서의 `e` 와 관련이 없다.





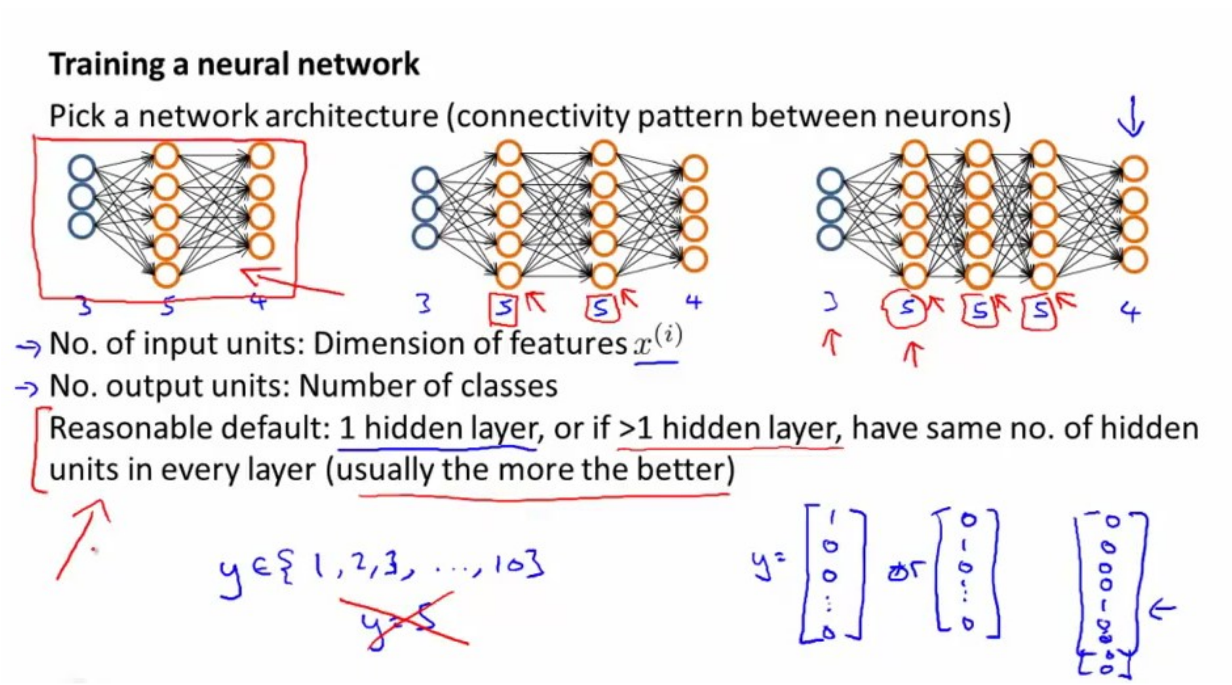
(http://blog.csdn.net/abcjennifer)

Putting It Toghther

(1) *neural network* 를 훈련시킬 때 먼저 해야 할 일은 아키텍쳐를 고르는 일이다.

output unit 과 *input unit* 은 *class* 와 *feature* 수로 결정된다. 문제는 *hidden unit* 과 *hidden layer* 의 수다.

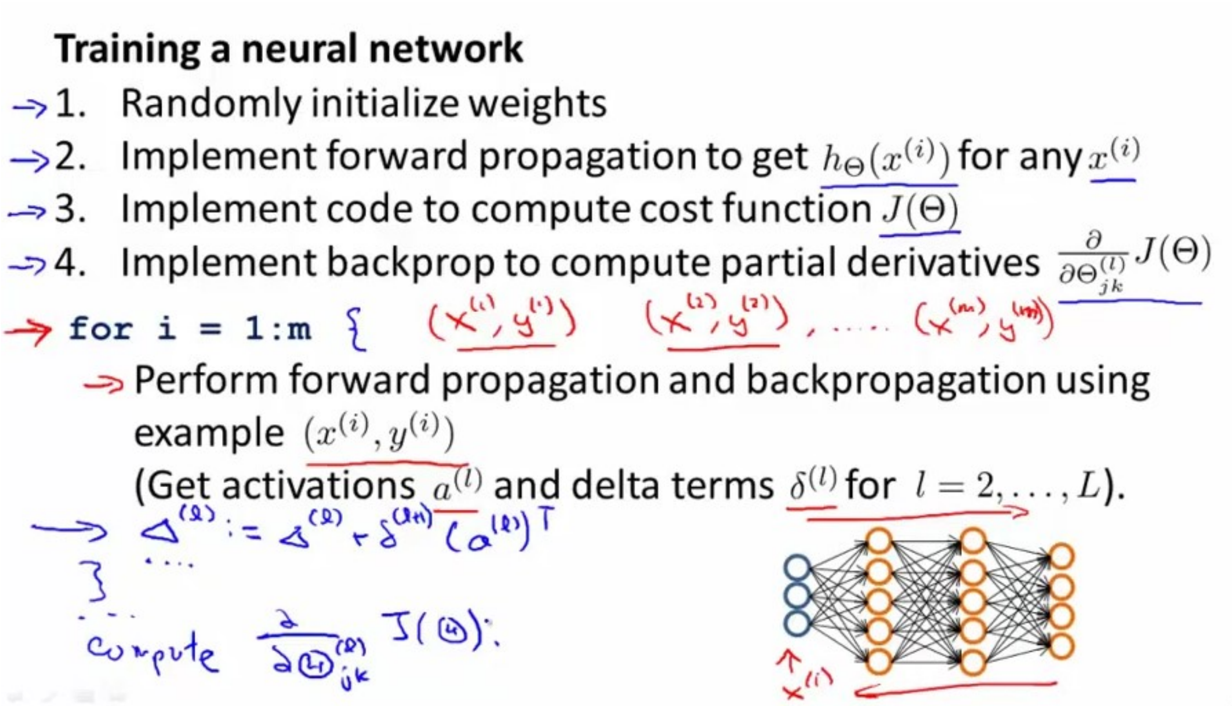
기본적으로는 1개의 히든 레이어를 사용하거나, 1개 이상을 사용한다면 같은 수의 히든 유닛을 모든 히든 레이어에서 사용하는것이 대부분 계산 비용 면에서 낫다.



(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

(2) *weights* 를 랜덤하게 초기화 한다.
(3) *forward propagation*
(4) *cost function* 을 구한다.
(5) *partial derivatives* 구하기 위해 *back propagation*

BP 를 할때는 *traning set* 의 수 `m` 번 만큼 루프를 돌면서 각 `(xi, yi)` 를 이용해 *FP*, *BP* 를 한다.

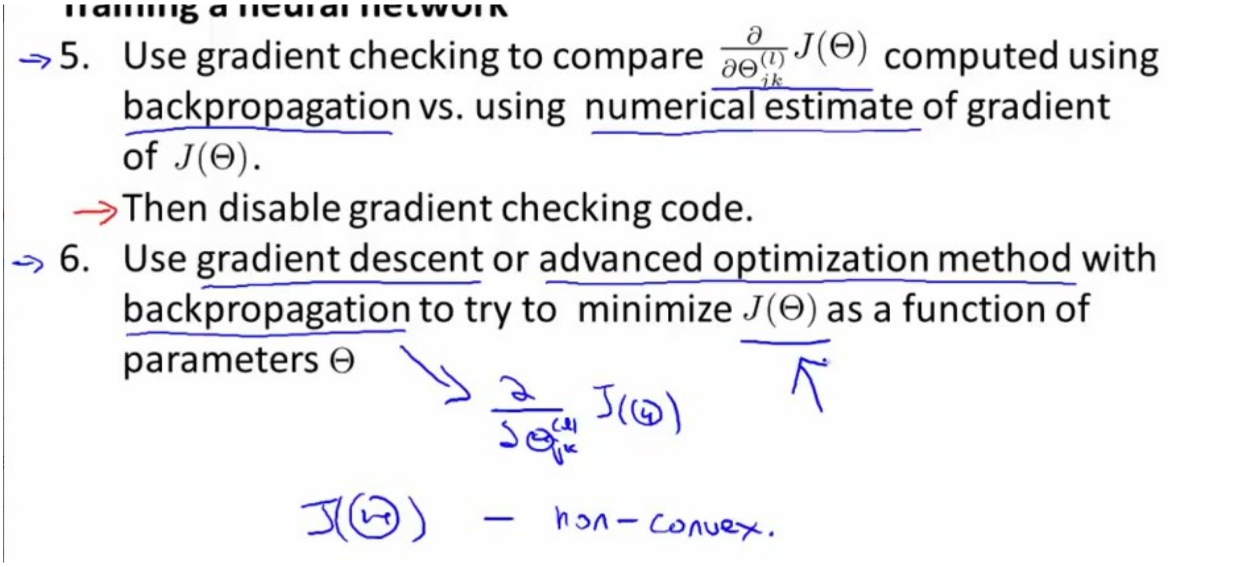


(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

(6) *gradient checking* 을 이용해 얻은 근사치와 *partial derivatives* 를 비교한다. 값이 적당히 비슷하면 *gradient checking* 코드를 제거한다.
(7) *cost function* 을 최소화 하기 위해 *gradient descent* 나 *advanced optimization method* 를 사용한다.

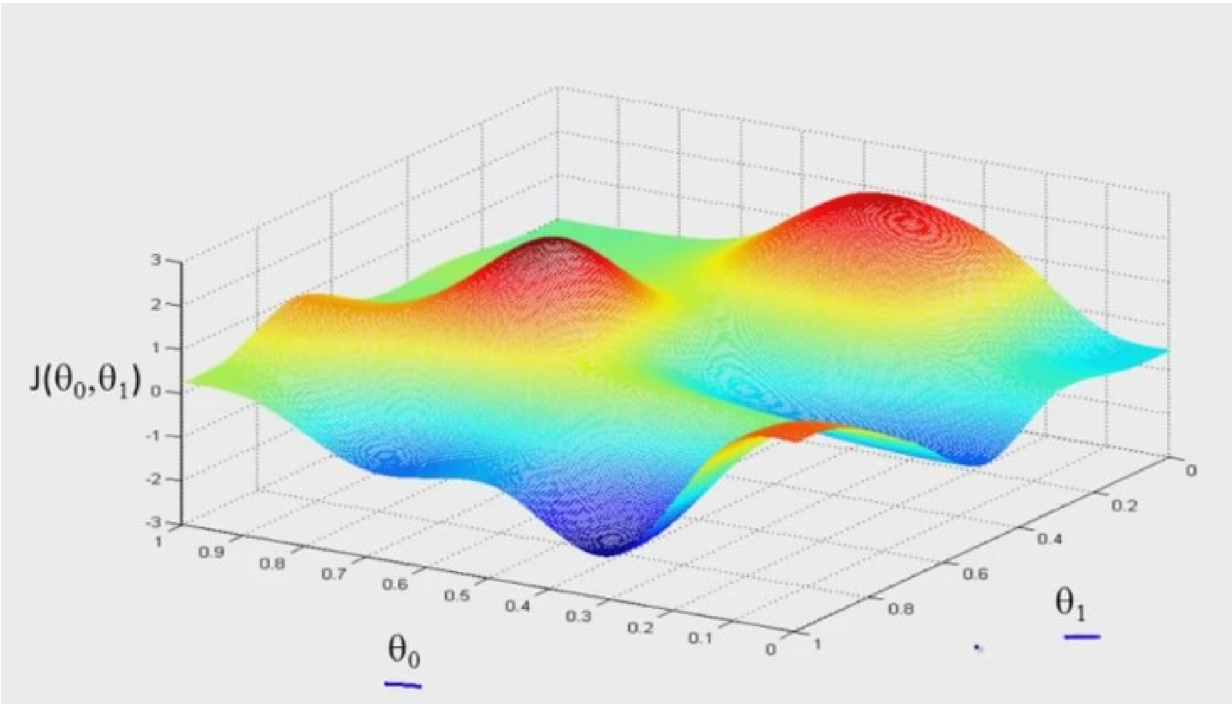
한 가지 알아야 할 사실은 *neural network* 의 *cost function* 은 *non-convex* 이기 때문에 *local optimum* 에서 멈출 수 있다.

그런데 문제가 굉장히 크다면 *gradient descent* 로 찾은 *local optimum* 도 충분히 좋은 값이라고 한다.



(http://blog.csdn.net/linuxcumt)

처음에 1장에서 봤던 언덕 그림이다.



(http://mapository.tistory.com/59)

여기서 *gradient descent* 가 하는 일은 언덕을 내려가는거고, *back propagation* 이 하는 일은 방향을 잡아주는 일이다.(`z` 가 변했을 때 *cost function* 값이 변하는 양인 오차 `d` 의 값이 적어지도록 방향을 잡아줌)

그래서 신경망에서 *gradient descent* 를 사용한다 하더라도 적당히 좋은 로컬 옵티멈을 찾아준다는 훈훈한 이야기

Autonomous Driving

무인 운전을 신경망으로 어떻게 해결하는지를 보여준다. 미리 사람이 한번 운전한 경로 (y) 를 바탕으로 학습하는데, 생각도 못해본 분야들에 이미 이런 기술들이 적용되어 있구나 싶다. ~~무려 1992년에 했던 실험이다~~

References

(1) http://aimotion.blogspot.kr/
(2) http://www.holehouse.org/mlclass/
(3) http://blog.csdn.net/abcjennifer/
(4) http://blog.csdn.net/linuxcumt